

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ И РАСТВОРЕНИЯ КСЕНОНА В ДИОКСИДЕ УРАНА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И СТАТИКИ РЕШЕТКИ

Прогнозирование поведения свойств радиоактивного топлива в процессе облучения и отжига невозможно без выявления механизма дефектообразования и эволюции дефектов в процессе эксплуатации топлива. Эксперименты в условиях облучения сложны, поэтому актуально компьютерное моделирование.

В настоящей работе методом молекулярной динамики проведено моделирование включений ксенона в диоксиде урана. При этом использовали нулевые граничные условия и парные потенциалы взаимодействия, которые зависели от расстояний между частицами и учитывали кулоновское взаимодействие ионов как точечных зарядов, а также отталкивание перекрывающихся электронных оболочек. Были рассмотрены системы размером 6144 частиц при температурах 300 К и 2600 К, содержащие ксенон в полостях от одной до четырех тривакансий. Найдено, что давление в полости из четырех тривакансий при изменении числа атомов ксенона от одного до четырех увеличивается от 6,96 ГПа до 30,59 ГПа при температуре 300 К и от 6,55 ГПа до 31,54 ГПа при температуре 2600 К, при этом основной вклад в давление вносит составляющая, зависящая от парных потенциалов взаимодействия атомов ксенона с ионами кристалла и между собой. Показано, что при увеличении размеров вакансионного кластера от двух до четырех тривакансий давление двух атомов ксенона изменяется от 33,13 ГПа до 14,65 ГПа при температуре 300 К и от 31,04 ГПа до 14,84 ГПа при температуре 2600 К.

Методом статистики решетки с использованием оболочечной модели и граничных условий Мотта-Литтлтона рассчитаны энергии образования дислокационных петель относительно идеальной конфигурации ионов, удельные энергии образования петель с учетом переноса удаленного при формировании петли вещества на поверхность кристалла. Определены энергии, необходимые для размещения атомов ксенона в анионных и катионных вакансиях на линиях краевых дислокаций. Оказалось, что при увеличении периметра петель энергии растворения атома Хе уменьшаются (с 1,72 эВ до 1,39 эВ в анионных вакансиях и с 7,52 эВ до 1,06 эВ в катионных вакансиях). Зависимости энергии внедрения Хе от длины дислокации при увеличении периметра выходят на «плато», высоты которых составляют 1,4 эВ для анионных вакансий и 1,0 эВ для катионных вакансий. Эти энергии существенно ниже, чем энергия растворения в тривакансии (4,1 эВ). Таким образом, показано, что дислокации являются выгодными позициями атомов ксенона в кристаллах с малым количеством вакансий (например, в стехиометрических кристаллах при достаточно низких температурах), где они могут становиться зародышами пузырьков.